МОДЕЛЬ АНДЕРСОНА ДЛЯ ОПИСАНИЯ МАГНИТНЫХ ПРИМЕСЕЙ В МЕТАЛЛЕ

ПОДГОТОВИЛ: БИКМУРЗИН М.А.

ГРУППА: ФТ-450005

КРАТКАЯ ТЕОРИЯ

- Примесь 0.1% и менее вызывает возникновение в металле необычных физических явлений (эффект Кондо и др.)
- Причина - влияние, оказываемое на электронный спектр атомами примеси с незамкнутыми внешними d– и f–оболочками
- При помещении атома примеси в кристаллическую решетку дискретные атомные уровни превращаются в электронные подзоны, ширина которых, значительно меньше, чем ширина s- и p- зон электронов проводимости

ОБОБЩЕННОЕ РЕШЕНИЕ

Из первых принципов можем построить гамильтониан (N электронов в присутстви уединенной примеси)

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + U(\mathbf{r}_i) + V_{\text{imp}}(\mathbf{r}_i)\right) + \frac{1}{2}\sum_{i\neq j}^{N}\frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} + \sum_{i=1}^{N}\lambda(\mathbf{r}_i)\,\mathbf{l}_i\cdot\sigma_i$$

Vimp - дополнительный потенцал, связанный с заменой одного из ядер
3-е слагаемое - спин-орбитальное взаимодействие

Для решения подобных задач подходит метод DFT при условии, что магнитный момент скомпенсирован и плотность элктронов однородна

ПОСТРОЕНИЕ МОДЕЛИ АНДЕРСОНА ПЕРВЫЙ ШАГ

Рассмотрим металл, зона проводимости которого образована электронами из s-атомных состояний:

1) Электроны - квазичастицы движущиеся в периодическом потенциале

2) Кулоновский потенциал экранируется

3) Пренебрегаем взаимодействием на малых расстояниях (зона широкая, состояния делокализованы)

Получаем:

$$\hat{H}_0 = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \varepsilon(\mathbf{k}) \hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k},\sigma} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}$$

Затравочный закон E(k) дисперсии определяется структурой решетки

ПОСТРОЕНИЕ МОДЕЛИ АНДЕРСОНА ДОБАВЛЕНИЕ ПРИМЕСНОГО ИОНА

Взаимодействие электронов с примесью учтем через функции Ванье

Vk - матричный элемент гибридизации

В данном случае R - любой вектор решетки, k - квазимпульс электронов

$$\phi_{\mathbf{R}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N_a}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

Na - число ячеек Вигнера-Зейца в кристалле, ψ - волна Блоха

$$V_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \langle \phi_d | \hat{H} | \phi_{\mathbf{R}} \rangle$$

Φd - волновая функция d оболочки магнитоного иона

ПОСТРОЕНИЕ МОДЕЛИ АНДЕРСОНА МОДЕЛЬ БЕЗ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Построенный на первых принципах гамильтониан без учета кулоновского взаимодействия, можно переписать

$$\hat{H} = \sum_{\sigma} \varepsilon_d \hat{c}^{\dagger}_{d,\sigma} \hat{c}_{d,\sigma} + \sum_{\mathbf{k},\sigma} \varepsilon(\mathbf{k}) \hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{K},\sigma} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} + \sum_{\mathbf{k},\sigma} (V_{\mathbf{k}} \hat{c}^{\dagger}_{d,\sigma} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} + V^{*}_{\mathbf{k}} \hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k},\sigma} \hat{c}_{d,\sigma})$$

Модель Андерсона без взаимодействия

Для получения конечной модели нужно учесть кулоновский член на d орбитали

ПОСТРОЕНИЕ МОДЕЛИ АНДЕРСОНА ФИНАЛЬНЫЙ ШАГ

Кулоновский интеграл:

$$U = \int \phi_d^*(\mathbf{r})\phi_d^*(\mathbf{r}')\frac{e^2}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\phi_d(\mathbf{r})\phi_d(\mathbf{r}')d\mathbf{r}d\mathbf{r}'$$

Для атомных d орбиталей U принимает значения до 30 эВ, что существенно
При помещении иона в решетку U уменьшается до 1-7 эВ

Итоговое выражение

$$\hat{H} = \sum_{\sigma}\varepsilon_d\hat{c}^{\dagger}_{d,\sigma}\hat{c}_{d,\sigma} + U\hat{n}_{d,\uparrow}\hat{n}_{d,\downarrow} + \sum_{\mathbf{k},\sigma}\varepsilon(\mathbf{k})\hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k},\sigma}\hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} + \sum_{\mathbf{k},\sigma}(V_{\mathbf{k}}\hat{c}^{\dagger}_{d,\sigma}\hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} + V^*_{\mathbf{k}}\hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k},\sigma}\hat{c}_{d,\sigma})$$

1,3 члены - кинетические слагаемые; 2 - потенциальное; 4 - гибридизация

ПАРАЛЛЕЛИ С МОДЕЛЬЮ ХАББАРДА

Общий вид модели Хаббарда

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle,\sigma} (\hat{c}^{\dagger}_{i,\sigma}\hat{c}_{j,\sigma} + \hat{c}^{\dagger}_{j,\sigma}\hat{c}_{i,\sigma}) + U \sum_{i=1}^{N} \hat{n}_{i\uparrow}\hat{n}_{i\downarrow}$$

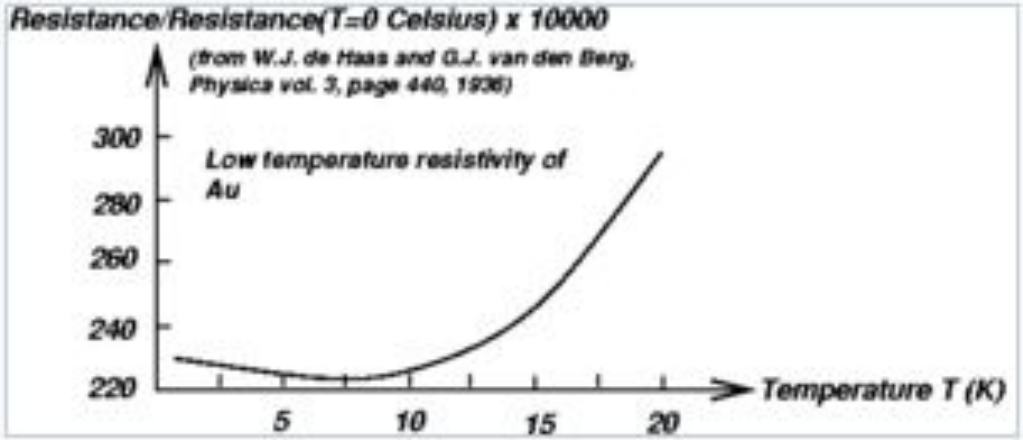
Общий вид модели Андерсона

$$\hat{H} = \sum_{\sigma} \varepsilon_d \hat{c}^{\dagger}_{d,\sigma}\hat{c}_{d,\sigma} + U\hat{n}_{d,\uparrow}\hat{n}_{d,\downarrow} + \sum_{\mathbf{k},\sigma} \varepsilon(\mathbf{k})\hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k},\sigma}\hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} + \sum_{\mathbf{k},\sigma} (V_{\mathbf{k}}\hat{c}^{\dagger}_{d,\sigma}\hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} + V^{*}_{\mathbf{k}}\hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k},\sigma}\hat{c}_{d,\sigma})$$

Если не учитывать кинетические члены, математически модели выглядят практически идентично, хоть и несут разный смысл

ПРИМЕНЕНИЕ

- Модель Андерсона активно используется в теории сильных электронных корреляций как самостоятельная модель, так и как вспомогательное средство
- В частности модель применяется для изучения задачи Кондо
- Эффект Кондо - появление минимума в зависимости сопротивления примесных сплавов от температуры



Зависимость сопротивления золота с небольшой примесью железа от температуры в эксперименте 1936 года

НЕСКОЛЬКО ПРОСТЫХ ПРЕДЕЛОВ

1)εd ≪ εF, εd + U ≫ εF - режим локализованного момента (кондовский предел)

$$\hat{H}_{s-d} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \varepsilon(\mathbf{k}) \hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k},\sigma} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} - \frac{J}{2} \sum_{\substack{\mathbf{k}\mathbf{k}' \\ \sigma\sigma'}} (\mathbf{S} \cdot \tau_{\sigma\sigma'}) \hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k},\sigma} \hat{c}_{\mathbf{k}',\sigma'}$$

Гамильтониан s-d обмена. S — оператор локализованного момента, τ — вектор матриц Паули

2)Режим переменной валентности - стартуя с кондовского предела уменьшаем расстояние между Ed и Ed + U

3,4)Два немагнитных режима - оба состояния выше и ниже уровня Ферми

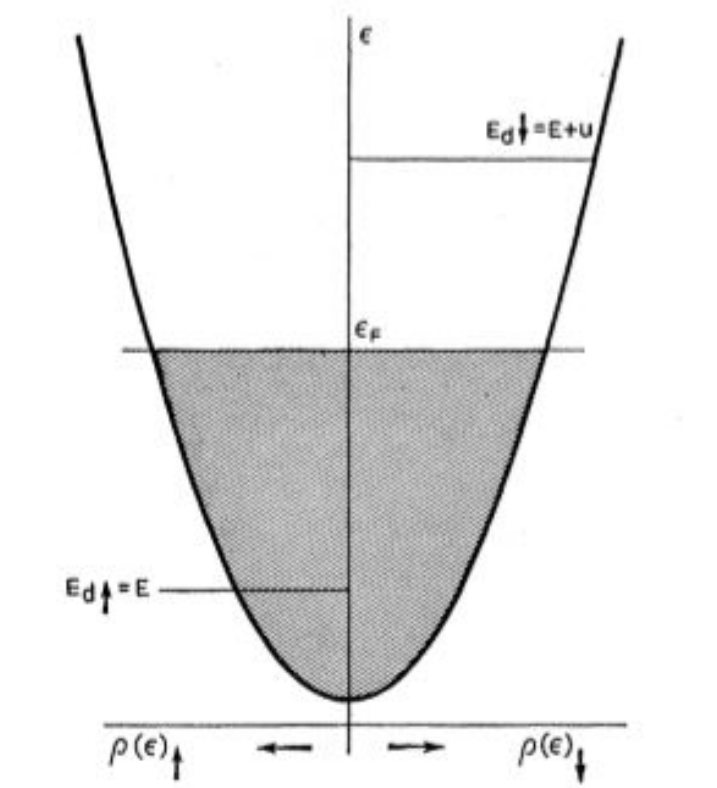


FIG. 1. Unperturbed energy levels in the absence of *s-d* admixture.

МОДЕЛЬ АНДЕРСОНА

Спасибо за внимание!